

Министерство образования и науки РФ

ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УДК 538.955

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по науке
_____ Кружаев В.В.
«___» _____ 2013

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

В рамках выполнения п. 1.2.2.3. Плана реализации мероприятий Программы развития УрФУ на
2013год

ПО ТЕМЕ:
ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СПИН-ФЛУКТУАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМ
СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В СОЕДИНЕНИЯХ PuCoGa_5 И PuRhGa_5
(Заключительный)

Договор возмездного оказания услуг (выполнения работ, на создание произведения) №1.2.2.3./45

Зав.кафедрой

(подпись, дата)

Повзнер А.А.

Научный руководитель

(подпись, дата)

Повзнер А.А.

Исполнитель

(подпись, дата)

Голубева Л.Р.

Екатеринбург 2013

Реферат

1. ФИО автора:

Голубева Линара Раушановна

Golubeva Linara Raushanovna

2. Аннотация:

До сих пор не выяснено за счет каких особенностей электронной структуры возникает сверхпроводимость соединений Pu-115 (PuRhGa_5 , PuCoGa_5). Принципиальной трудностью распространения результатов первопринципных расчетов электронной структуры на сверхпроводящие системы заключается в том, что их основное состояние не относится к нормальной фазе. В связи с этим представляет интерес расчет электронной структуры, магнитной восприимчивости нормальной фазы $\chi(T)$ совместно с анализом неустойчивости системы к образованию куперовских пар при конечных температурах.

В настоящей работе, в рамках многозонной df-модели Хаббарда для сильно коррелированных электронов, исследуется электронная структура сплавов и соединений Pu-115 и рассматривается спин-флуктуационный механизм возникновения сверхпроводимости. Самосогласованный расчет плотности электронных состояний PuRhGa_5 и PuCoGa_5 (LDA+U+SO) и $\chi(T)$, согласуется с экспериментальными данными. Оценочные значения температуры сверхпроводящего перехода T_c исследуемых соединений, выполненные на основе установленной электронной структуры PuRhGa_5 и PuCoGa_5 , сильно зависят от параметра fd-обменного взаимодействия $J^{(fd)}$ и согласуются с экспериментальными данными.

It is still not clear what the features of the electronic structure affect on the emergence of superconductivity of Pu-115 compounds (PuRhGa_5 , PuCoGa_5). It is principally difficult to extend the results of ab initio calculations of the electronic structure on the superconducting systems due to the fact that their ground state is not a normal phase. Thus the calculation of the electronic structure and the magnetic susceptibility in the normal phase $\chi(T)$ together with analysis of system instability to Cooper pairing at final temperatures is interesting.

In this paper, the electronic structure of alloys and Pu-115 compounds is investigated and the spin-fluctuation mechanism of superconductivity is considered in the framework of the multi-zone Hubbard df-model for strongly correlated electrons. The self-consistent calculation of DOS of PuRhGa_5 and PuCoGa_5 (LDA+U+SO) with $\chi(T)$ is in agreement with the experimental data. The estimated values of the temperature of superconducting transition T_c of the compounds under investigation, which have been

carried out based on obtained electronic structures of PuRhGa₅ and PuCoGa₅, highly depend on the parameter of fd-exchange interaction $J^{(fd)}$ and are consistent with experimental data.

3. Ключевые слова:

Сверхпроводник, электронная структура, магнитная восприимчивость, спиновые флуктуации, критическая температура.

Superconductor, electronic structure, magnetic susceptibility, spin fluctuations, critical temperature.

4. Тема отчета:

Электронная структура и спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости в соединениях PuCoGa₅ и PuRhGa₅

The electronic structure and spin-fluctuation mechanism of superconductivity in PuCoGa₅ and PuRhGa₅ compounds.

Содержание

Введение.....	5
1. Сверхпроводимость в соединениях плутония.....	6
2. Многозонная модель.....	11
3. Результаты расчетов и их обсуждение.....	17
Заключение.....	25
Список литературы.....	26

Введение

Сильно коррелированные d- и f-металлы обнаруживают аномалии электронных и магнитных свойств, природа которых до сих пор остается предметом дискуссий. Особое место в этой группе занимают 5f-металлы и соединения на их основе, располагающиеся на границе между сверхпроводящими и магнитоупорядоченными состояниями, либо в непосредственной близости от нее. Электронная структура этих веществ характеризуется наличием псевдощели между зонами $5/2$ и $7/2$ мультиплетов, обусловленной огромным спин-орбитальным взаимодействием. Однако с какими ее особенностями связано возникновение сверхпроводимости все еще не выяснено.

Открытие сверхпроводимости в интерметаллическом соединении на основе плутония PuCoGa_5 явилось неожиданностью в связи со сравнительно высоким значением температуры перехода $T_c=18.5$ К. При этом замещение родительского материала PuCoGa_5 в узле Со различными переходными металлами приводит к снижению параметров сверхпроводимости. В частности не смотря на то, что соединения PuCoGa_5 и PuRhGa_5 являются изоструктурными, последний имеет более низкую критическую температуру $T_c=8.9$ К. Поэтому для выяснения природы сверхпроводимости необходимо знание зонной структуры, достоверные сведения о которой в случае PuCoGa_5 и PuRhGa_5 в настоящее время отсутствуют.

1 Сверхпроводимость в соединениях плутония

Изучение электронных свойств плутония представляется актуальным не только в прикладном, но и фундаментальном аспектах. В тоже время электронная структура плутония, которая непосредственно влияет на его металлургические свойства, плохо изучена. До сих пор остается не ясным, в какой мере наблюдаемые электронные аномалии обусловлены пограничным, между локализованным и абсолютно делокализованным способами описания, состоянием его 5f-электронов [1], а в какой - конкуренцией различных типов сильных взаимодействий (приводящих к новым флуктуационным и резонансным эффектам). Кроме того, согласно [1] плутоний можно отнести к сильно парамагнитным металлам, чье магнитное состояние лежит на границе, разделяющей парамагнитные и магнитоупорядоченные вещества (что является косвенным указанием на значимую роль флуктуаций спиновой плотности в формировании физических свойств Pu).

Открытие сверхпроводимости в интерметаллическом соединении плутония PuCoGa_5 при критической температуре $T_c \sim 18.5 \text{ K}$ [2] дополнительно стимулировало интерес к изучению и анализу природы электронных свойств плутония. Из результатов низкотемпературных измерений магнитной восприимчивости PuCoGa_5 [2] видно, что происходит резкий диамагнитный переход при 18.5 К. Этот признак при низких температурах соответствует почти 100% идеальному диамагнетизму, а скачек удельной теплоемкости в PuCoGa_5 на 18.5 К, говорит о наличии объемного фазового перехода. Удельное электрическое сопротивление изменяется примерно как $T^{1.35}$ и падает до нуля при $T < 18.5 \text{ K}$ (т.е. в сверхпроводящей фазе), а магнитная восприимчивость изменяется по закону Кюри-Вейса. Совместно эти данные обеспечивают убедительное доказательство наличия объемной сверхпроводимости в PuCoGa_5 , впервые наблюдаемой в соединении плутония.

За почти столетнюю историю исследования сверхпроводимости было открыто огромное число сверхпроводящих составов. Но несмотря на большое разнообразие сверхпроводящих материалов, соединение PuCoGa_5 сложно отнести к какому-либо из этих классов. Механизм сверхпроводимости данного соединения до сих пор не ясен. По мнению авторов [2] сверхпроводимость PuCoGa_5 является результатом аномальных электронных свойств плутония.

В обычных сверхпроводниках с фононным механизмом спаривания как спин, так и угловой момент куперовской пары равны нулю. Поэтому макроскопическое квантовое состояние, в которое конденсируются куперовские пары, отделено энергетической щелью от возбужденного состояния с неспаренными электронами. Вследствие этого физические величины, определяемые плотностью электронных состояний вблизи уровня Ферми, имеют термоактивированную

температурную зависимость при $T < T_c$. Если же куперовские пары образуются из-за обмена антиферромагнитными спиновыми флуктуациями, то их момент импульса отличен от нуля, так что энергетическая щель равна нулю в некоторых точках импульсного пространства. Это приводит к степенным температурным зависимостям при $T < T_c$. Нули энергетической щели экспериментально обнаружены в двух классах сверхпроводников: слоистых медно-оксидных ВТСП и соединениях с тяжелыми фермионами на основе церия или урана. Это служит основой для предположения, что и в тех, и в других механизм сверхпроводимости является нефононным. Однако огромное (на два порядка) различие T_c порождает сомнения в справедливости такого предположения.

Сверхпроводник PuCoGa_5 по величине T_c занимает промежуточное положение между тяжелофермионными сверх-проводниками с $T_c \sim 1$ К и высокотемпературными купратными сверхпроводниками (ВТСП) с $T_c \sim 100$ К. В этой связи большой интерес представляет совместная работа ученых Los Alamos National Laboratory (США) и Chonnam National Univ (Корея) [3], в которой получены убедительные экспериментальные аргументы в пользу сверхпроводимости с d-спариванием в PuCoGa_5 . Как спиновая восприимчивость χ_s , так и скорость спин-решеточной релаксации T_1^{-1} при $T < T_c$ ведут себя в точном соответствии с теорией для сверхпроводника с d-спариванием с дефектами (которых в PuCoGa_5 очень много из-за процессов радиоактивного распада ядер плутония, например, $^{239}\text{Pu} \rightarrow ^{235}\text{U} + \alpha\text{-частица}$ [1]). Более того, при $T > T_c$ температурная зависимость T_1^{-1} также качественно отличается от наблюдаемой в БКШ сверхпроводниках, зато совпадает с T_1^{-1} в ВТСП Y-123 и в тяжелофермионном сверхпроводнике CeCoIn_5 , а кроме того – с предсказаниями для скорости релаксации за счет антиферромагнитных спиновых флуктуаций [3]. Действительно, предположение, что спаривание электронов обусловлено обменом фононами, описываемым в рамках классической БКШ теории, не дает согласия с экспериментальными данными для PuCoGa_5 [4]. В частности, не удастся объяснить столь высокое значение критической температуры порядка 18.5 К. Оцененная по формуле 1 критическая температура T_c для соединения PuCoGa_5 в работе [4] получилась равной 7.4 К:

$$T_c = \frac{\langle \omega \rangle}{1.20} \exp \left\{ - \frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* (1 + 0.62\lambda)} \right\} \quad (1)$$

Здесь: $\langle \omega \rangle$ - фононная усредненная частота, λ – константа электрон-фононного взаимодействия, μ^* - эффективный потенциал кулоновского отталкивания.

Таким образом, PuCoGa_5 играет роль своеобразного "мостика" (на шкале T_c) между сверхпроводниками с тяжелыми фермионами и ВТСП [3]. Общим для всех этих классов материалов,

помимо "необычного" сверхпроводящего состояния, являются очень сильные кулоновские корреляции между электронами атомных f-оболочек (в CeCoIn_5 и PuCoGa_5) или d-оболочек (в ВТСП), которые приводят, соответственно, к резкому увеличению эффективной массы электрона или к переходу в состояние моттовского диэлектрика. Сосуществование близких по энергии локализованного и делокализованного состояний благоприятствует магнитному механизму спаривания электронов. Авторы [3] предполагают, что PuCoGa_5 можно отнести к классу материалов, в которых антиферромагнитные флуктуации создают необычную форму сверхпроводимости, где электронное спаривание может быть связано с повышенной гибридизацией в соответствии с предсказаниями моделей магнито-обусловленной (со спин-флуктуационным механизмом) сверхпроводимости. Однако для подтверждения этой гипотезы и понимания причин, вызывающих такую высокотемпературную сверхпроводимость PuCoGa_5 требуются всесторонние исследования этого материала, как в сверхпроводящем, так и в нормальном состоянии.

Отмеченная выше невозможность описания данной сверхпроводимости через электрон-фононное взаимодействие, также как и близость сверхпроводящей фазы к антиферромагнитной на фазовой диаграмме нового сверхпроводника PuCoGa_5 , привели к росту популярности моделей спаривания, основанных на определяющей роли магнитных (спиновых) флуктуаций, во многом аналогичных рассматриваемым в физике ВТСП купратов.

Например, в рамках RPA-приближения [5] было показано, что возникновение сверхпроводящего состояния с d-симметрией параметра порядка, может быть обусловлено спариванием электронов через спиновые флуктуации и должно усиливаться при приближении электронной системы к точке магнитной неустойчивости. Однако приближение к точке магнитной неустойчивости требует учета ангармонизма спиновой подсистемы, что выходит за границы применимости RPA-приближения. Кроме того, данный подход не объясняет наблюдаемые температурные зависимости восприимчивости нормальной фазы [5] и не дает оценок T_c сопоставимых с наблюдаемыми на эксперименте.

Таким образом, в большинстве работ, рассматривающих механизм спаривания, основанный на обмене спиновыми флуктуациями, дело пока не дошло до прямых вычислений T_c и сравнения с экспериментом.

Следует также отметить, что замещение родительского материала PuCoGa_5 ($\text{Pu}_x\text{An}_{1-x}$)($\text{Co}_x\text{T}_{1-x}$) Ga_5 малыми количествами актинидов ($\text{An}=\text{U}, \text{Np}$) и различными переходными металлами ($\text{T}=\text{Fe}$ и Ni) приводит к снижению параметров сверхпроводимости [6]. В том числе снижается и температура сверхпроводящего перехода T_c . Изменения критической температуры при замещении представлены на рисунке 1.

Легирование в узле актинида Pu дает появление сверхпроводимости в соединениях $(\text{Pu}_{0.9}\text{U}_{0.1})\text{CoGa}_5$ и $(\text{Pu}_{0.9}\text{Np}_{0.1})\text{CoGa}_5$ ниже $T_c \approx 8.4$ К и $T_c \approx 7.2$ К, соответственно. Соединения UCoGa_5 и NpCoGa_5 являются парамагнитными и антиферромагнитными соответственно. В UCoGa_5 магнитная восприимчивость почти не зависит от температуры, и удельная теплоёмкость показывает, что $\gamma = 21$ мДж·моль⁻¹·К⁻². NpCoGa_5 является сильным магнетиком при $T = 47$ К, показывая упорядоченный момент 0.82 μ_B/Np , меньше, чем 0.05 μ_B в узле Co, и $\gamma = 64$ мДж·моль⁻¹·К⁻².⁷⁻⁸ Во всех системах AnCoGa_5 , основанных на актинидах 5f-электроны являются мигрирующими, актинидный ион находится в приблизительно тривалентном состоянии, а 3d-состояния заполнены и ниже энергии ферми. Расширение исследования в работе [6] до неизоэлектронных элементов легированием PuCoGa_5 двумя ближайшими соседями кобальта (3d⁷), т.е. Fe(3d⁶) и Ni(3d⁸) показывает наступление сверхпроводимости при 13.5 К, 10.0 К и 16.4 К для $\text{Pu}(\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.1})\text{Ga}_5$, $\text{Pu}(\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{Ga}_5$ и $\text{Pu}(\text{Co}_{0.8}\text{Ni}_{0.1})\text{Ga}_5$, соответственно.

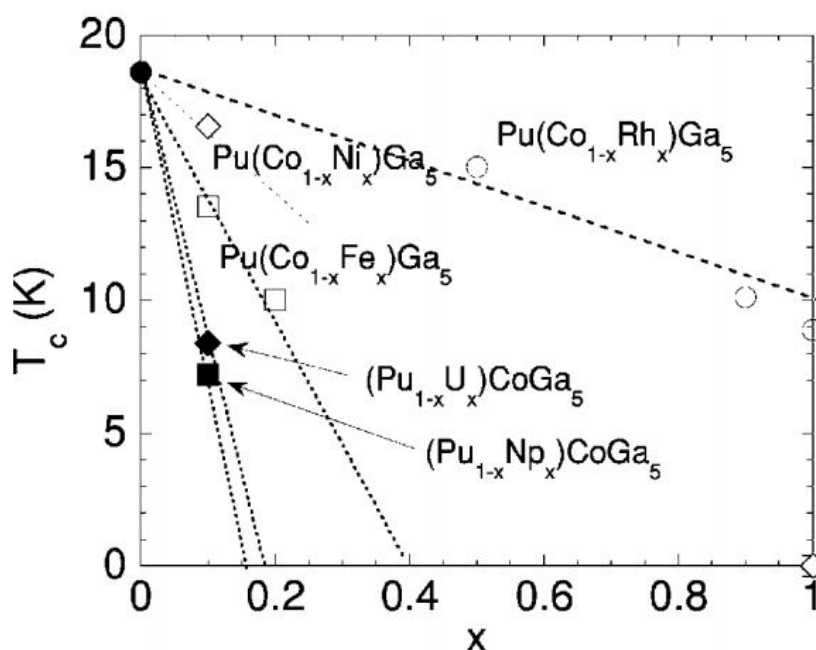


Рисунок 1. Критическая температура T_c как функция концентрации x в $(\text{Pu}_x\text{An}_{1-x})(\text{Co}_x\text{T}_{1-x})\text{Ga}_5$ системах [7]

Видно, что замещение актинида более заметно влияет на критическую температуру. Грубая линейная экстраполяция предсказывает, что T_c могла бы исчезнуть при ~18% Np или ~20% U. Такое быстрое исчезновение сверхпроводимости делает сосуществование сверхпроводимости и магнетизма маловероятным в $(\text{Pu}_x\text{Np}_{1-x})\text{CoGa}_5$, поскольку наблюдаемый в NpCoGa_5 магнитный порядок не может выжить при столь низких концентрациях Np. Замещение на переходный металл оказывается менее деструктивным для сверхпроводимости в PuCoGa_5 . Авторы [6] подчеркивают,

что сверхпроводимость выживет при 40% Fe и даже более высоких значениях для Ni. Наконец, Rh-замещение имеет очень слабое влияние на T_c , поскольку чистый PuRhGa_5 также является сверхпроводником с критической температурой $T_c=8.9$. Важно отметить, что легирование родием является изoeлектронным (Co и Rh располагаются в одном столбце периодической таблицы), в то время как легирование с помощью Fe и Ni, так же, как и актинид-ионное имеют иной электронный счёт, в отличие от PuCoGa_5 .

Эти исследования подсказывают, что целостность подрешётки Pu более важна для сверхпроводимости, чем периодичность d -электронных элементов. Таким образом, в некоторых случаях (например, при замещении Co в PuCoGa_5 переходными металлами Fe и Ni) замещения губительны для сверхпроводимости. В этом смысле соединения PuCoGa_5 и PuRhGa_5 представляют наибольший интерес для исследований.

2 Многозонная модель

Ожидается, что сверхпроводимость PuCoGa_5 и PuRhGa_5 связана с подсистемами сильно коррелированных f-(или d-)электронов. Последние характеризуются режимом хаббардовских корреляций – $U/zt \sim 1$ (U – параметр внутриатомного хаббардовского взаимодействия, t – интеграл перескока, z – число ближайших соседей), приближающимся к условиям электронного перехода Мотта-Хаббарда [7]. При этом электронная подсистема рассматриваемых металлов не описывается в рамках первопринципных подходов, основанных на использовании однозонной модели Хаббарда. Поэтому требуется рассмотреть многозонную модель Хаббарда, в которой наряду с зонным движением d- и f- электронов, учитывается их внутриатомное кулоновское и обменное взаимодействия:

$$H = H_0^{(s,p)} + H_{ff} + H_{dd} + H_{fd}. \quad (2)$$

Здесь:

$$H_0^{(l)} = \sum_{l,\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{l,\mathbf{k}} a_{l,\mathbf{k},\sigma}^+ a_{l,\mathbf{k},\sigma} \quad (3)$$

- гамильтониан невзаимодействующих электронов sp-, d- или f-электронов ($l=\text{sp}, \text{d}, \text{f}$);

$$H_{fd} = \sum_{\mathbf{q}, l \neq l'} J_{\mathbf{q}}^{(l,l')} \mathbf{S}_{\mathbf{q},l} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q},l'} \quad (4)$$

- гамильтониан межузельного обменного взаимодействия f- и d-электронов; а H_{ff} и H_{dd} - гамильтонианы систем f- и d-электронов, имеющие одинаковую структуру, включающие в себя гамильтониан невзаимодействующих электронов $H_0^{(l)}$ ($l = \text{f}$ или d), гамильтониан межузельного обменного взаимодействия

$$H_{ex}^{(l)} = \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}}^{(l,l)} \mathbf{S}_{\mathbf{q},l} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q},l}, \quad (5)$$

а также гамильтониан их внутриатомного хаббардовского отталкивания на узле, который может быть записан через Фурье образы операторов зарядовой и спиновой плотности:

$$H_U^{(l)} = U_l \sum_{\mathbf{q}} \left| \mathbf{S}_{\mathbf{q},l} \mathbf{e}_{\mathbf{q},l} \right|^2 - U_l \sum_{\mathbf{q}} \left| \frac{N_{\mathbf{q},l}}{2} \right|^2; \quad (6)$$

$H_h^{(l)} = \sum_l h_0 S_{0,l}^{(z)}$ - гамильтониан, описывающий зеемановский сдвиг электронных энергий; $\varepsilon_{l,\mathbf{k}}$ - одноэлектронные зонные энергии; $a_{l,\mathbf{k},\sigma}^+$ ($a_{l,\mathbf{k},\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электронов ($l = \text{sp,d,f}$) с квазиимпульсом \mathbf{k} и спиновым квантовым числом $\sigma = \pm 1$; $J_{\mathbf{q}}^{(l,l')}$ и U_l - Фурье-образ параметра межузельного обменного взаимодействия и параметр внутриатомного кулоновского отталкивания электронов; $N_{\mathbf{q},l} = \sum_{\sigma} N_{\mathbf{q},l,\sigma}$, $N_{\mathbf{q},l,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} a_{l,\mathbf{k},\sigma}^+ a_{l,\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}$ - Фурье-образ оператора плотности числа электронов на узле со спином σ , \mathbf{q} - квазиимпульс, $\mathbf{S}_{\mathbf{q},l}$ - Фурье-образ оператора вектора спиновой плотности электронов, $\mathbf{e}_{\mathbf{q},l}$ - единичный комплексный вектор вдоль оси квантования Фурье-образа оператора спиновой плотности электронов, по направлениям которого в дальнейшем будет выполнено усреднение, h_0 - внешнее магнитное поле, выраженное в единицах два магнетона Бора, и направленное вдоль оси Oz .

В результате преобразований Лапласа, исследуемая многочастичная задача с гамильтонианом (2) может быть сведена к исследованию движения невзаимодействующих электронов во флуктуирующих в пространстве и времени внутренних стохастических обменных ($\xi_{l,v}$) и зарядовых ($\eta_{l,v}$) полях. При этом матрица рассеяния приобретает вид:

$$\sigma(\beta) = \iint T_{\tau} \exp \left\{ - \left[\sum_{v,l} \left(\xi_{l,v} + h/c_0 \right)^2 + |\eta_{l,v}|^2 \right) + \sum_{v,\mu} \sum_{l \neq l'} A_{v,\mu} \xi_{l,v} \xi_{l',\mu} \right] - \beta H(V) \right\} (d\xi d\eta), \quad \text{где } T_{\tau} -$$

оператор упорядочения по мацубаровскому времени τ , а эффективный гамильтониан оказывается аналогичным гамильтониану БКШ-теории

$$H(V) = \sum_{k,l,\sigma} \varepsilon_{k,l} a_{k,l,\sigma}^+ a_{k,l,\sigma} + \sum_{k,q,l,\sigma} V_{q,l,\sigma} a_{k,l,\sigma}^+ a_{k+q,l,\sigma} + \sum_{k,q,l} \left(V_{q,l}^{(+)} a_{k,l,\downarrow}^+ a_{k+q,l,\uparrow} + \text{h.c.} \right). \quad (7)$$

Здесь: $V_{l,v}^{(+)} = (\xi_{l,v,x} + i\xi_{l,v,y})/\sqrt{2}$, $V_{q,l,\sigma} = \xi_{l,v,z} + i\sigma\eta_{l,v}/2$, $\mathbf{v} = (\mathbf{v}, \tau)$,

$$(d\xi d\eta) = \prod_{l,\gamma} \left(d\xi_{l,0,\gamma} d\eta_{l,0}/\pi \prod_{q \neq 0, j=1,2} d\xi_{l,q,\gamma}^{(j)} d\eta_{l,q}^{(j)}/\pi \right), \quad c_q^{(l)} = \left[U^{(l)} T \left(1 + J_q^{(fd)} / U^{(l)} \right) \right]^{1/2},$$

$$\eta_{l,v} = \sum_q e^{iqv} c_q^{(l)} \eta_{l,q}, \quad \sum_v (...) = T \int_0^\beta d\tau \sum_v (...), \quad \bar{\xi}_{l,v} = \sum_q \exp(iqv) c_q^{(l)} \bar{\xi}_{l,q},$$

$$A_q = J_q^{(fd)} / \prod_{l \neq l'} \left(1 + J_q^{(fd)} \left((2U^{(l)} + U^{(l')}) / U^{(l)} U^{(l')} \right) \right), \quad J_q^{(fd)} - \text{Фурье-образ параметра межузельного fd-}$$

обменного взаимодействия, $l = f, d$, $\gamma = x, y, z$, $q = (\vec{q}, \omega_{2n})$, $k = (\mathbf{k}, \omega_{2n+1})$, ω_{2n} и ω_{2n+1} – мацубаровские бозе и ферми частоты, $U^{(l)}$ – константа Хаббарда.

Вычисляя далее статистическую сумму $Z(h) = \text{Sp}(\sigma(\beta))$, можно определить наивероятнейшую конфигурацию стохастических полей и отвечающую ей амплитуду флуктуаций спиновой плотности (ФСР). Для вычисления последней можно воспользоваться методом перевала по переменным $\xi_{0,l}^{(\gamma)}$, $\eta_{l,q}$, $r_{l,q,\gamma}$, $\theta_{l,q,\gamma}$, ($\xi_{l,q,\gamma} = r_{l,q,\gamma} \exp(i\theta_{l,q,\gamma})$ для $q \neq 0$). Данная процедура позволяет не только найти выражение для статистической суммы, но и определить наивероятнейшую конфигурацию стохастических полей, а также средние квадраты поперечной ($\xi_{l,\perp}^2$) и продольной ($\xi_{l,z}^2$) компонент стохастического поля которые пропорциональны (в парамагнитном случае) амплитудам флуктуаций соответствующих компонент спиновой плотности. В результате для среднего квадрате обменного поля на узле – $\xi_l^2 = \xi_{l,\perp}^2 + \xi_{l,z}^2$ имеем

$$\xi_l^2 = B^{(l)} (D^{(l)} T)^2 \left\{ 1 + 4 \frac{J^{(fd)^2}}{U^{(f)} U^{(d)}} \frac{D^{(l)} D^{(l')}}{1 - B^{(l')} D^{(l')} / B^{(l)} D^{(l)}} \left(2 + \frac{B^{(l')^3} D^{(l')^2}}{B^{(l)^3} D^{(l)^2}} \right) \right\}. \quad (8)$$

Здесь: $l \neq l'$, $D^{(l)}$ – фактор обменного усиления восприимчивости d- или f-электронов, $J^{(fd)}$ – однородная часть межузельного f-d-обменного взаимодействия, $B^{(l)}$ – коэффициент разложения функции Линдхарда l-электронов по частоте в приближении эффективной массы.

При этом выполняя двойное дифференцирование статистической суммы по внешнему магнитному полю в соответствии с известным термодинамическим соотношением, находим спиновую магнитную восприимчивость

$$\chi = \sum_{l=f,d} \chi^{(l)} + \chi^{(sp)} + Q_0^{(fd)} \chi^{(f)} \chi^{(d)} \quad (9)$$

Здесь: $\chi^{(sp)} = 2g_0^{(sp)}(\mu)$ и $\chi^{(l)} = 2U_l^{-1} (1 - D_{0,l}^{-1}) D_{0,l}$ – парамагнитные восприимчивости s(p)- и d,f-электронов,

$$D^{(l)-1} = \left(1 - U^{(l)} \chi_{\perp}^{(l)}(\xi_l) + \kappa_l \xi_{l,z}^2 \right) \quad (10)$$

- фактор обменного усиления парамагнитной восприимчивости d- или f-электронов,

$$\kappa_l = \left(1/\xi_l^2 \right) \left[\left(U_l + Q^{(l,l)} \right) \chi_{\perp}^{(l)}(\xi_l) - \left(U_l + Q^{(l,l)} \right) \chi_{\parallel}^{(l)}(\xi_l) \right] \quad (11)$$

- константа спиновой жесткости, $\chi_{\perp}(\xi_l)$ и $\chi_{\parallel}^{(l)}(\xi_l) = 2 \prod_{\alpha=\pm 1} g_0^{(l)} \left(\mu + \frac{1}{2} U_l n_l + \alpha \xi_l \right) / \sum_{\alpha=\pm 1} g_0^{(l)} \left(\mu + \frac{1}{2} U_l n_l + \alpha \xi_l \right)$ - поперечная и продольная паулиевские восприимчивости электронов, движущихся в стохастических внутренних обменном и зарядовом полях, N_l – величина орбитального вырождения состояний l -ой зоны ($l=f, d$), δ_l – среднее энергетическое расстояние между энергиями мультиплетов l -ой зоны. (Отметим, что при записи выражения 10 учтено, что в парамагнитном случае $\xi_{l,z}^2 = \xi_{l,\perp}^2 / 2 = \xi_l^2 / 3$).

Переходя далее к анализу условий возникновения сверхпроводимости за счет синглетного спаривания l -электронов, рассмотрим нормальную и аномальную функции Грина:

$$G_{k,\sigma}^{(l)} = Sp \left\{ T_{\tau} a_{l,\mathbf{k},\sigma}^+ a_{l,\mathbf{k},\sigma} \sigma(\beta) \right\} / Sp \left\{ T_{\tau} \sigma(\beta) \right\}, \quad F_{k,l}^{(\uparrow\downarrow)} = Sp \left\{ T_{\tau} a_{l,\mathbf{k},\uparrow}^+ a_{l,-\mathbf{k},\downarrow} \sigma(\beta) \right\} / Sp \left\{ T_{\tau} \sigma(\beta) \right\} \quad (12)$$

и построим ряд теории возмущения по потенциалам взаимодействия $V_{l,v,\sigma}$ и $V_{l,v}^{(\pm)}$. Суммирование ряда выполним для наивероятнейшей конфигурации стохастических полей. Пренебрегая многократными процессами рассеяния на флуктуациях зарядового и модуля обменного стохастических полей (которые маловероятны, поскольку связаны с большими флуктуациями электронных энергий) получим систему уравнений для нормальной и аномальной функций Грина.

$$F_{k,l}^{(\uparrow\downarrow)} = \xi_{l,\perp}^2 G_{k,\uparrow}^{(0,l)} G_{-k,\downarrow}^{(l)} \sum_q F_{k+q,l}^{(\uparrow\downarrow)} + G_{k,\uparrow}^{(0,l)} F_{k,l}^{(\uparrow\downarrow)} \sum_q \left\langle \left| \delta \xi_{l,q,\perp} \right|^2 \right\rangle G_{k+q,\downarrow}^{(l)} - \\ - G_{k,\uparrow}^{(0,l)} G_{-k,\downarrow}^{(l)} \sum_q \left(\left\langle \left| \delta \xi_{l,q,z} \right|^2 \right\rangle + \left\langle \left| \delta \eta_{l,q} \right|^2 \right\rangle \right) F_{k+q,l}^{(\uparrow\downarrow)}, \quad (13)$$

$$G_{k,\sigma}^{(l)} = G_{k,\sigma}^{(0,l)} + \xi_{l,\perp}^2 G_{k,\sigma}^{(0,l)} F_{k,\sigma}^{(\sigma\bar{\sigma})} \sum_q \left(F_{k+q,l}^{(\sigma\bar{\sigma})} \right)^+ + G_{k,\sigma}^{(0,l)} \left(F_{k,l}^{(\sigma\bar{\sigma})} \right)^+ \sum_q \left\langle \left| \delta \xi_{l,q,\perp} \right|^2 \right\rangle F_{k+q,l}^{(\sigma\bar{\sigma})} - \\ - G_{k,\sigma}^{(0,l)} F_{k,l}^{(\sigma\bar{\sigma})} \sum_q \left(\left\langle \left| \delta \xi_{l,q,z} \right|^2 \right\rangle + \left\langle \left| \delta \eta_{l,q} \right|^2 \right\rangle \right) \left(F_{k+q,l}^{(\sigma\bar{\sigma})} \right)^+ \quad (14)$$

Здесь: $l = f, d$, $G_{k,\sigma}^{(0,l)} = (1/2) \sum_{\alpha=\pm 1} \left(\omega_{2n+1} - \varepsilon_{l,k} - U^{(l)} n_l / 2 - \alpha \xi_l \right)^{-1}$ – электронная функция Грина нормальной фазы в парамагнитном случае, $n_l = \sum_{\alpha=\pm 1} \int d\varepsilon g_0^{(l)}(\varepsilon) f(\varepsilon + U^{(l)} n_l / 2 - \alpha \xi_l - \mu)$ – заполнение l -ой зоны.

При вычислении функции Грина нормальной фазы ($G_{k,\sigma}^{(0,l)}$), было учтено взаимодействие электронов с флуктуирующими обменными полями приводящее к спин-флуктуационным перенормировкам электронного спектра. В области магнитной неустойчивости эти перенормировки соответствуют расщеплению электронного спектра обменными полями, флуктуации которых являются крупномасштабными (т.е. радиус спиновых корреляций больше периода решетки). Для возникновения неустойчивости по отношению к образованию куперовских пар за счет парамагнитного механизма, радиус спиновых корреляций не должен превышать размеры куперовских пар.

Поэтому анализ перенормировок электронного спектра приводящих к сверхпроводимости, должен быть основан на учете как крупномасштабных, так коротковолновых спиновых флуктуаций (СФ). Кроме того, учитывая эквивалентность эффективного гамильтониана рассматриваемой системы и используемого в теории БКШ можно записать уравнение относительно синглетного параметра порядка $\Delta_l^2 = T \xi_{l,\perp}^2 \sum_k F_{k,l}^{(\uparrow\downarrow)}$. При этом рассматривая условия возникновения сверхпроводящей фазы со стороны нормального состояния электронной подсистемы можно ограничиться учетом лишь наинизших степеней Δ_l^2 . Тогда уравнение относительно Δ_l приобретает вид:

$$\xi_{l,\perp}^2 \left(\frac{U_l \left(\sum_{\alpha=\pm 1} \alpha g_0^{(l)} \left(\mu - \frac{1}{2} U_l n_l - \alpha \xi_l \right) \right)^2}{\sum_{\alpha=\pm 1} g_0^{(l)} \left(\mu - \frac{1}{2} U_l n_l - \alpha \xi_l \right)} + 4 \kappa_l \xi_l^2 \right) = 4 U_l T, \quad (15)$$

Это условие соответствует формированию сверхпроводящей фазы за счет обмена парамагнонами. При этом рост амплитуды ФСП приводит к пропорциональному увеличению

температуры T_C , только в пределе низкоэнергетических ФСП (когда $\mu - \frac{1}{2}U_l n_l \gg \alpha \xi_l$). Кроме того известно, что температурный рост амплитуд ФСП приводит к формированию выше некоторой температуры T^* температурно-индуцированных локальных магнитных моментов, соответствующих режиму поперечных ФСП. В этих условиях константа спиновой жесткости принимает отрицательные значения, а неустойчивость к сверхпроводимости исчезает.

Для расчета одноэлектронной плотности состояний PuRhGa_5 можно воспользоваться методом LDA+U+SO в базисе FP-LAPW, позволяющим учесть гибридизацию d,f-состояний. Однако, поскольку основное состояние данного соединения является сверхпроводящим, расчеты энергетических спектров могут быть выполнены лишь в области температур соответствующих нормальной фазе ($T > T_C$). Поэтому, развивалась самосогласованная процедура, объединяющая первопринципный расчет DOS с модельным численным расчетом амплитуды ФСП и магнитной восприимчивости.

$$\chi_{\text{orb}}^{(l)} = \sum_{\alpha, \alpha' (= \pm 1)} \frac{n_l [N_l - n_l]}{[N_l (\delta_l + \xi_l (\alpha - \alpha'))]} . \quad (16)$$

Сопоставление выражение для восприимчивости с экспериментальными данными проводилось после добавления в формулу 9 орбитального (ванн-флековского) вклада $\chi_{\text{orb}}^{(l)}$.

3 Результаты расчетов и их обсуждение

Оба рассматриваемых сплава обладают тетрагональной кристаллической решеткой (группа симметрии $P4/mmm$). Периоды решетки PuCoGa_5 равны $a=4.232$ Å, $c=6.786$ Å, а PuRhGa_5 – $a=4.301$ Å, $c=6.857$ Å.

Результаты расчета парциальных плотностей состояний PuCoGa_5 приведены на рисунке 2. Основной вклад в плотность электронных состояний PuCoGa_5 на уровне Ферми (ϵ_F) дают d-электроны ($g_f(\epsilon_F)=0.499$ 1/эВ·атом, $g_d(\epsilon_F)=0.604$ 1/эВ·атом, вклады f- и d-электронов в DOS соответственно), а плотность s,p-состояний оказывается слабо зависящей от энергии. Следует отметить, что достаточно высокая плотность d-состояний обусловлена электронами кобальта, а не плутония. Подзона 5f-электронов с величиной $j=5/2$ практически полностью заполнена (заполнение 5f-зоны составляет $n_f=5.052$), d-состояния также в основном заполнено ($n_d=7.796$), но имеется достаточно длинный «хвост» плотности состояний правее уровня Ферми (пустые состояния), что делает возможным участие d-электронов в сверхпроводимости.

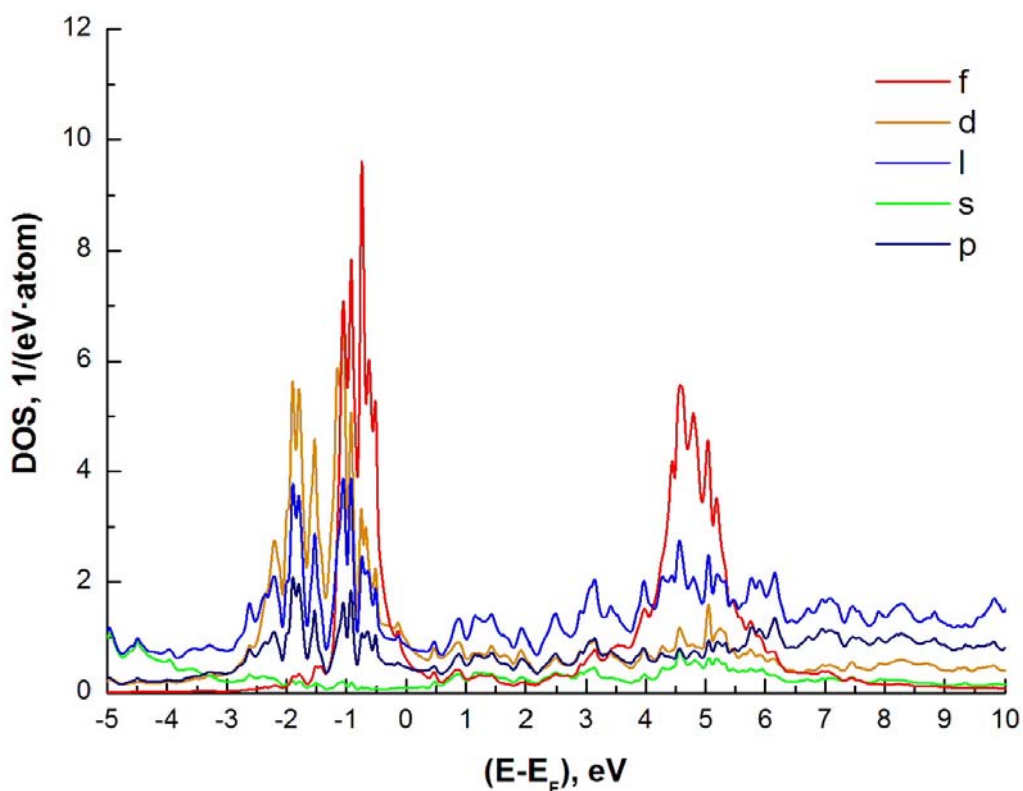


Рисунок 2. Парциальные плотности электронных состояний PuCoGa_5 (обозначение l здесь и далее означает межузельную плотность состояний)

Сопоставление результатов расчетов магнитной восприимчивости с экспериментальными данными [2] проведено для значений параметров внутриатомного межэлектронного взаимодействия: $U_f = 2$ эВ, $U_d = 1.6$ эВ, хундовского обменного взаимодействия $J_H = 0.48$ эВ. Значение параметра межузельного fd-обменного взаимодействия $J^{(fd)}$ варьировалось от 0 до 0.26 эВ. Полученное среднее энергетическое расстояние между мультиплетными энергиями $\Delta_l = 3$ эВ, что соответствует половине энергетического расстояния между центрами зон, отвечающих f- и d-мультиплетам (рисунок 2). Кроме этого, при расчете восприимчивости найдены параметры мнимой части функции Линхарда f- и d-электронов: $B^{(f)}=0.6$ и $B^{(d)} = B^{(f)} \left(U^{(d)} g_0^{(d)}(\epsilon_F) / U^{(f)} g_0^{(f)}(\epsilon_F) \right)$. Как следует из анализа полученных температурных зависимостей магнитной восприимчивости PuCoGa₅ (рисунок 3), основной вклад в зависимость $\chi(T)$ также вносят f-электроны, флуктуации спиновой плотности которых близки к насыщению. Их восприимчивость описывается законом Кюри-Вейсса, а коэффициент спиновой жесткости – положителен и монотонно убывает с ростом температуры.

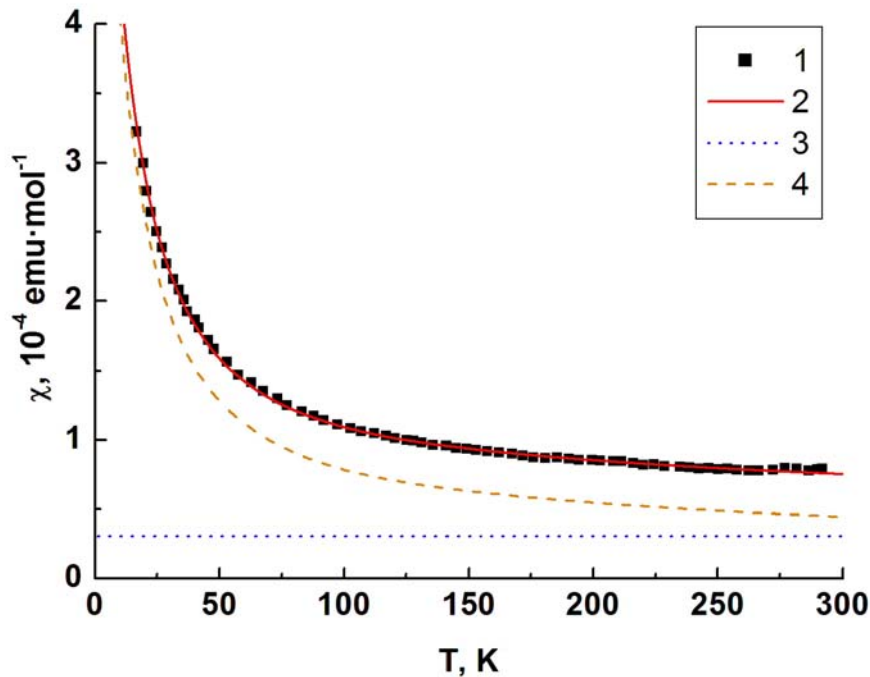


Рисунок 3. Температурная зависимость магнитной восприимчивости PuCoGa₅: 1 – экспериментальные данные [2]; 2, 3, 4 – результат расчета в настоящей работе: 2 – полная величина восприимчивости, 3 – орбитальная составляющая, 4 – спиновая составляющая

Температурное изменение магнитной восприимчивости d-электронов PuCoGa_5 соответствует переходу от паулиевской зависимости к обобщенному кюри-вейссовскому закону (рисунок 3). При этом особенностью влияния спин-флуктуационных перенормировок в системе d-электронов является возникновение максимума на температурной зависимости их магнитной восприимчивости. Возникновение этой особенности обусловлено минимумом на температурной зависимости отрицательного по знаку коэффициента спиновой жесткости в области низких температур. Характерно, что эта особенность возникает вблизи температуры сверхпроводящего фазового перехода. При этом значение температуры сверхпроводящего перехода PuCoGa_5 при $J^{(fd)} = 0$ согласно уравнению (15) оказывается равным 10 К. Учет межзонного взаимодействия приводит к экспериментально наблюдаемому значению - 18.5 К при $J^{(fd)} = 0.14$ эВ (при более высоких значениях параметра взаимодействия имеет место рост T_C , например для $J^{(fd)} = 0.26$ эВ получаем 42 К).

Численный анализ разработанной модели показывает, что величина T_C растет с увеличением амплитуды спиновых флуктуаций и модуля отрицательного коэффициента спиновой жесткости, что соответствует условиям сильного спинового ангармонизма. При положительном значении константы спиновой жесткости рассматриваемый механизм сверхпроводимости не реализуется при любых амплитудах флуктуаций спиновой плотности. Например, это имеет место в $\delta\text{-Pu}$, который также находится в области кроссовера, но сверхпроводимость в нем экспериментально не обнаружена. Последнее согласуется с результатом анализа возможности спин-флуктуационного синглетного спаривания, который проводился в рамках численной модели электронной структуры $\delta\text{-Pu}$, полученной на основе самосогласованных расчетов его плотности электронных состояний и магнитной восприимчивости [8]. Коэффициенты спиновой жесткости f-и d-электронов в данной модели положительны. Сдвиг уровня Ферми вправо по шкале энергий (приближение к псевдощели) обуславливает неустойчивость к формированию сверхпроводимости. Однако согласие расчетов с экспериментальными данными о температурной зависимости магнитной восприимчивости при этом нарушается.

Таким образом, спиновые флуктуации могут обеспечить синглетное спаривание сильно коррелированных f-и d-электронов и привести к возникновению сверхпроводимости. Такой механизм реализуется в условиях, когда пространственные размеры спин-флуктуационной области не превышают размеры электронной куперовской пары. При этом коэффициент спиновой жесткости должен быть отрицательным, что возможно в сравнительно узком интервале температур при наличии на плотности состояний вблизи уровня Ферми особенности типа минимума. Усилению сверхпроводящей неустойчивости так же способствуют межзонное взаимодействие и приближение к точке магнитной неустойчивости системы сильно

коррелированных электронов. В PuCoGa_5 этот эффект приводит к спариванию d-электронов с более высоким значением T_C .

Результаты расчета парциальных плотностей состояний PuRhGa_5 приведены на рисунке 4. Для PuRhGa_5 наблюдается слабая зависимость плотности состояний d-электронов от энергии вблизи положения химического потенциала, а основной вклад в DOS на уровне Ферми (ϵ_F) дают f-состояния Pu ($g_f(\epsilon_F)=0.45$ 1/эВ·атом, $g_d(\epsilon_F)=0.183$ 1/эВ·атом). Также можно отметить некоторое понижение высоты пиков на плотностях состояний d- и f-электронов, в результате чего они становятся сопоставимы с межузельной плотностью состояний. Значения заполнения f- и d-зон равны $n_f=4.619$, $n_d=6.467$, соответственно.

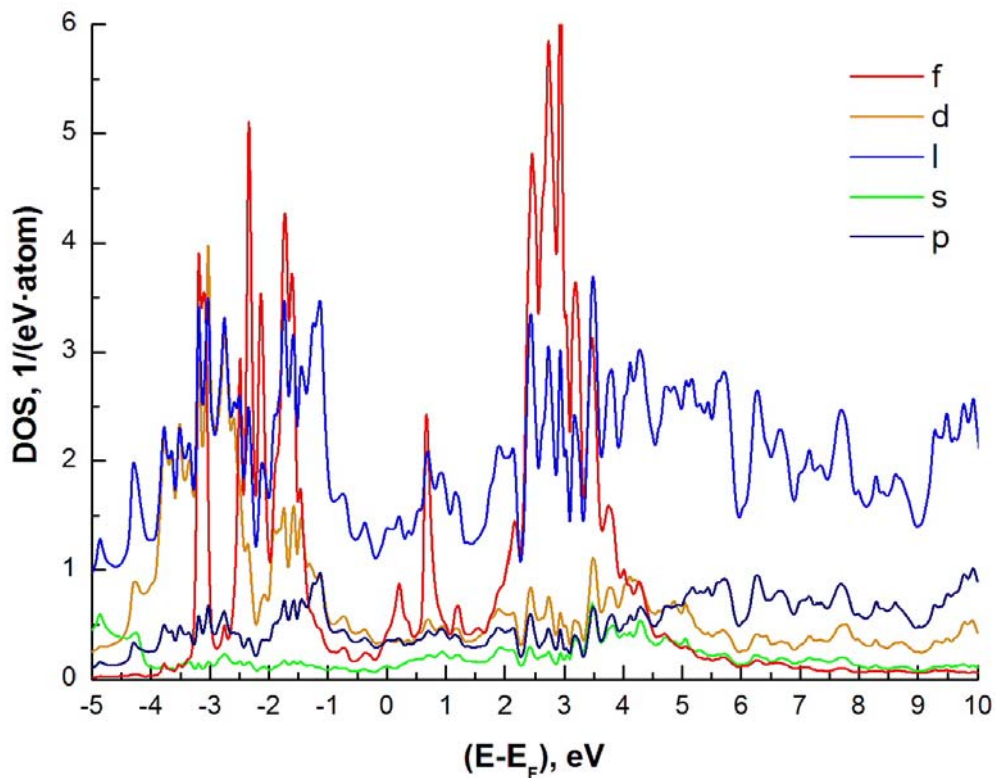


Рисунок 4. Парциальные плотности электронных состояний PuRhGa_5

Сопоставление результатов расчетов магнитной восприимчивости с экспериментальными данными [6] проведено для значений параметров внутриатомного межузельного взаимодействия: $U_f = 2.1$ эВ, $U_d = 1.5$ эВ хундовского обменного взаимодействия $J_H = 0.85$ эВ и межузельного fd-обменного взаимодействия $J^{(fd)} = 0.25U_f$ эВ. Среднее расстояние между мультиплетными энергиями $\Delta_l = 2.5$ эВ, $B^{(f)}=0.55$ и $B^{(d)} = B^{(f)} \left(U^{(d)} g_0^{(d)}(\epsilon_F) / U^{(f)} g_0^{(f)}(\epsilon_F) \right)$.

Основной вклад в зависимость $\chi(T)$ PuRhGa₅ (рисунок 5) вносят f-электроны, относительная величина которого изменяется от 90% до 40% при изменении температуры от 0 К до 300 К. Восприимчивость этой группы электронов описывается обобщенным законом Кюри-Вейсса (рисунок 5). Из-за наличия в непосредственной близости от положения химического потенциала локального максимума на зависимости $g_0^{(f)}(\varepsilon)$, спин-флуктуационные перенормировки спектра f-электронов оказываются значительными, вследствие чего флуктуации спиновой плотности близки к насыщению. Однако, вследствие перераспределения электронов между f-, d- и sp-состояниями и, обусловленного межзонным обменным взаимодействием, взаимного «подмагничивания» f- и d-подсистем эффект насыщения амплитуды FSD в системе f-электронов не достигается. Поэтому константа спиновой жесткости – отрицательна и резко изменяется с температурой (химический потенциал располагается в области отрицательной кривизны зависимости $g_0^{(f)}(\varepsilon)$ (рисунок 4)). При этом орбитальный вклад в восприимчивость, в основном обусловленный одной и той же группой электронов, практически не изменяется.

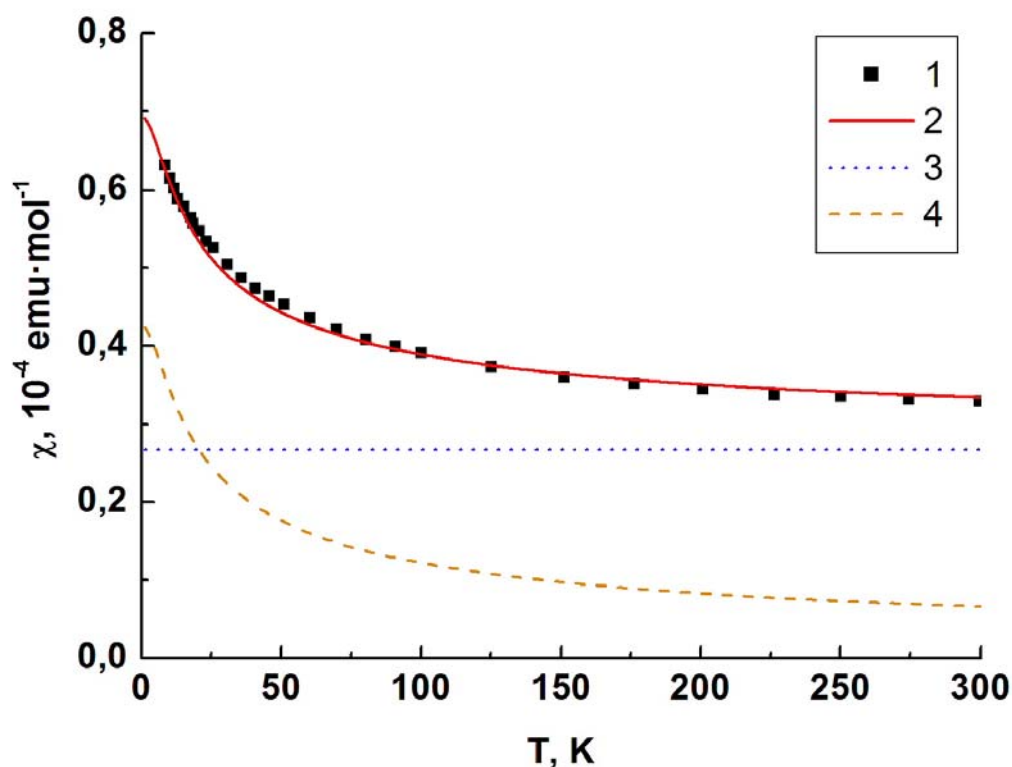


Рисунок 5. Температурная зависимость магнитной восприимчивости PuRhGa₅: 1 – экспериментальные данные [6]; 2, 3, 4 – результат расчета в настоящей работе: 2 – полная величина восприимчивости, 3 – орбитальная составляющая, 4 – спиновая составляющая

Плотность d- состояний в области псевдощели слабо изменяется во всем рассматриваемом энергетическом интервале окрестности химического потенциала (рисунок 4). Поэтому спин-флуктуационные перенормировки спектра d-электронов слабо влияют на температурную зависимость спиновой магнитной восприимчивости, а неустойчивость к сверхпроводимости в системе d-электронов не возникает. Иная картина возникает в системе f-электронов PuRhGa₅ для которых в области псевдощели возникает дополнительный пик связанный с учетом гибридизационных эффектов. Анализ условия электронейтральности показывает, что химический потенциал находится в энергетической области указанной особенности плотности электронных f-состояний. С одной стороны это обуславливает возникновение кюри-вейссовской зависимости спиновой магнитной восприимчивости. С другой стороны формирует неустойчивость к сверхпроводимости в системе f-электронов. Константа спиновой жесткости оказывается отрицательной и сильно зависящей от температуры, что указывает на наличие сильного спинового ангармонизма. Оценочные значения температуры сверхпроводящего перехода, выполненные на основе установленной электронной структуры PuRhGa₅, сильно зависят от параметра df-обменного взаимодействия. Величина $T_C=10$ К (экспериментальное значение 8.9 К [6]) получается при $J_0^{(fd)}=0.25$ эВ. Уменьшение этого значения $J_0^{(fd)}$ ведет к резкому падению оценочного значения величины T_C . Следует также отметить, что в непосредственной области вблизи температуры сверхпроводящего перехода согласно расчетам реализуется режим, в котором продольные флуктуации начинают исчезать. Последнее можно интерпретировать как возникновение конкуренции между длинноволновыми и коротковолновыми флуктуациями обменных полей.

Другие результаты получаются при расчете электронной структуры основного состояния соединений на основе плутония типа 115 в рамках метода LDA+U+SO при использовании базиса LMTO, которые предпринималась в работе [9]. При этом самосогласование с экспериментальными данными о спиновой магнитной восприимчивости не проводилось. Рассчитанная плотность состояний вблизи энергетического положения химического потенциала качественно одинакова и не позволяет объяснить как температурную зависимость магнитной восприимчивости, так и возникновение сверхпроводимости по спин-флуктуационному механизму.

Таким образом, в PuRhGa₅ реализуется картина сильных спиновых корреляций, на фоне которых возможно возникновение неустойчивости системы f-электронов к возникновению сверхпроводимости. Иная ситуация имеет место в соединении PuCoGa₅, где неустойчивость к сверхпроводимости возникает в системе d- электронов. Электронный химический потенциал этого соединения находится в области отрицательной кривизны плотности d-электронных состояний, тогда как константа спиновой жесткости для f-электронов положительна во всем рассматриваемом

интервале температур. Возникновение в случае PuRhGa_5 дополнительного f-пика в области псевдощели связано с изменением, по сравнению с PuCoGa_5 , чисел заполнения электронных d- и f-состояний и кулоновского взаимодействия электронов 5/2-мультиплета. Причиной изменений чисел заполнения при замене в соединении 115 переходного металла (Co на Rh) являются гибридизационные эффекты в системе сильно коррелированных d- и f-электронов. При этом значение заполнения d-зоны родия отличается от значения $n_d=7.62$, полученного в работе [9], а значения заполнения f-зоны плутония и d-зоны родия равны $n_f=4.619$, $n_d=6.019$, соответственно. В связи с этим актуальным являются независимые исследования заполнения исследования d- и f-состояний. Кроме того важны всесторонние экспериментальные исследования фотоэмиссионных спектров для допированных кристаллов PuRhGa_5 . Представляют интерес данные по сплавам, получающимся как заменой Rh другими переходными элементами, так и к замене плутония соседними элементами группы трансурановых металлов.

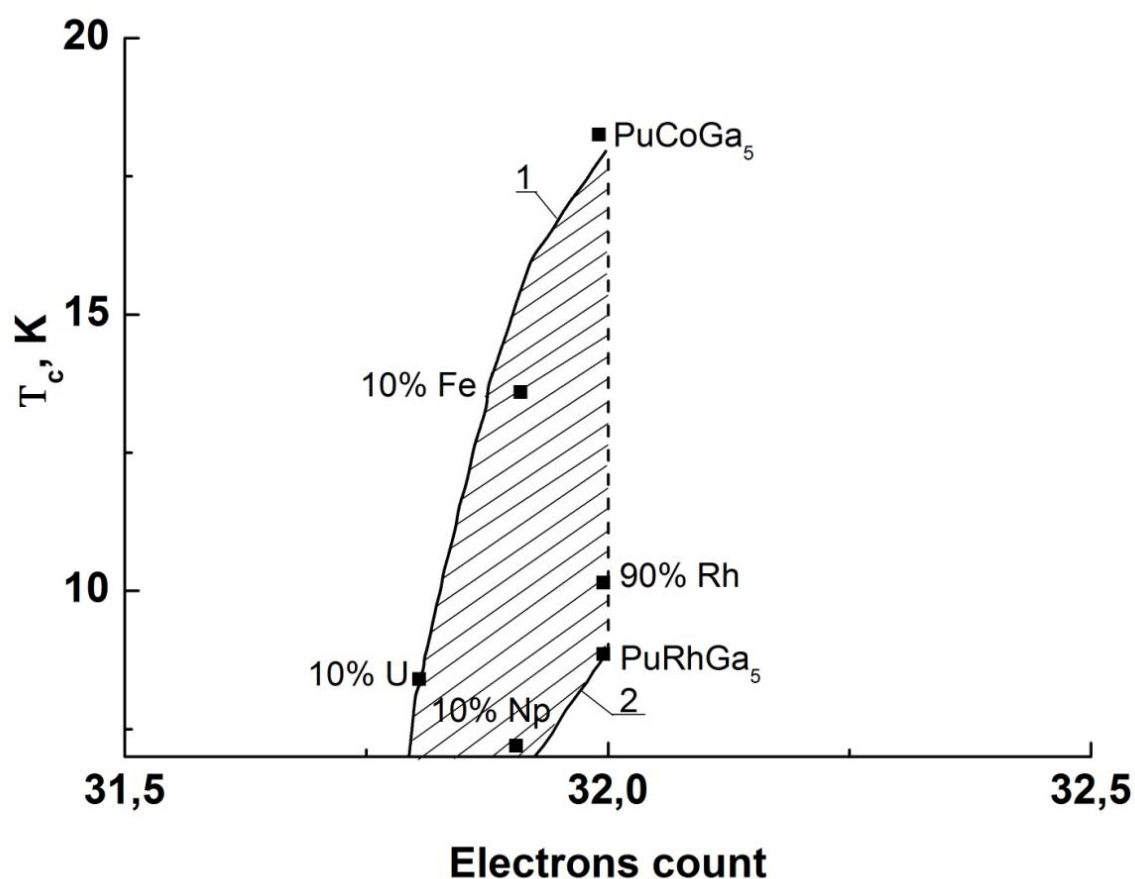


Рисунок 6. Результаты расчетов концентрационной зависимости температуры возникновения сверхпроводимости соединений $\text{Pu}_{1-x}\text{Np}_x\text{CoGa}_5$, $\text{PuCo}_x\text{Rh}_{1-x}\text{Ga}_5$, $\text{PuCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ga}_5$ и $\text{Pu}_{1-x}\text{U}_x\text{CoGa}_5$ ($x=0,1$): 1 – соответствует $J_{\max}^{(fd)}$, 2 – соответствует $J^{(fd)}=0$, ■ – экспериментальные данные [6]

На рисунке 6 представлены результаты расчетов концентрационной зависимости температуры возникновения сверхпроводимости в легированных соединениях $\text{Pu}_{1-x}\text{Am}_x$, $\text{Pu}_{1-x}\text{Np}_x\text{CoGa}_5$, $\text{PuCo}_x\text{Rh}_{1-x}\text{Ga}_5$.

Кривая 1 на рисунке 6 соответствует максимально возможному значению $J_{\text{max}}^{(fd)}$, оцененному из условия возникновения ферромагнитного состояния PuFeGa_5 , а кривая 2 получена для значения $J^{(fd)}=0$. При различных значениях $0 < J^{(fd)} < J_{\text{max}}^{(fd)}$ значения T_c лежат в заштрихованной области, что и наблюдается на эксперименте [6]. В частности, в рамках развитого подхода удалось описать концентрационную зависимость температуры возникновения сверхпроводимости соединений $\text{Pu}_{1-x}\text{Np}_x\text{CoGa}_5$, $\text{Pu}_{1-x}\text{U}_x\text{CoGa}_5$ и $\text{PuCo}_x\text{Rh}_{1-x}\text{Ga}_5$ ($x=0,1$, т.е. процент легирующего элемента 10% Np, 10% U и 10% Co, соответственно).

Учет этих факторов указывает на важность экспериментальных исследований допированных систем обеспечивающих возможность контролируемого изменения концентраций d- или f-электронов.

Заключение

В большинстве работ, рассматривающих механизм спаривания, основанный на обмене спиновыми флуктуациями, дело пока не дошло до прямых вычислений T_C и сравнения с экспериментом. Полученные результаты позволяют в рамках единой модели получить данные по электронным, магнитным и сверхпроводящим свойствам по которым наблюдается большой дефицит сведений как в отечественной, так и в зарубежной литературе.

Рассчитаны восприимчивости соединений PuCoGa_5 и PuRhGa_5 в реальной зонной структуре. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментом. Последнее указывает на то, что определенное первопринципными расчетами основное состояние исследуемых соединений, соответствует реализующемуся в действительности.

На температурной зависимости магнитной восприимчивости d-электронов $\text{PuCoGa}_5 \chi^{(d)}(T)$ возникает максимум, связанный с минимумом на температурной зависимости отрицательного по знаку коэффициента спиновой жесткости. Эта особенность возникает вблизи температуры сверхпроводящего фазового перехода. Рассчитанное значение T_C PuCoGa_5 при $J^{(fd)} = 0$ оказывается равным 10 К. Учет межзонного взаимодействия приводит к экспериментально наблюдаемому значению - 18.5 К при $J^{(fd)} = 0.14$ эВ (при более высоких значениях параметра взаимодействия возможен рост T_C , например для $J^{(fd)} = 0.26$ эВ получаем 42 К). В силу положительности константы спиновой жесткости для d-электронов спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости в этой подсистеме не реализуется. Оценка температуры сверхпроводящего перехода, выполненная на основе установленной электронной структуры PuRhGa_5 , дает величину $T_C = 10$ К (экспериментальное значение 8.9 К) при $J^{(fd)} = 0.25$ эВ. При этом следует отметить, что уменьшение значения $J^{(fd)}$ ведет к резкому падению величины T_C . Таким образом, полученные результаты по оценке температур сверхпроводящего перехода хорошо согласуются с экспериментом.

Развитый с использованием обобщенной spdf-модели может быть применен и к другим сверхпроводящим сплавам.

Список использованных источников

1. Hecker S.S. // Metallurgical and materials transactions. – 2008. - V. 39A. – P. 1585.
2. Sarrao J.L., Morales L.A., Thompson J.D. et al. // Nature. - 2002. - V. 420. - P. 297.
3. Surro N.J., Caldwell T. et al. // Nature. - 2005. - V. 434. - P. 622.
4. Piekarz P., Parlinski K., Jochym P.T. et al. // Phys. Rev. B. - 2005. - V. 72. - P. 014521.
5. Qi X.-L., Raghu S., Liu C.-X. et al. // arXiv:0804.4332v2 [cond-mat.supr-con] 28 Apr 2008.
6. Boulet P., Colineau E. et al. // Phys. Rev. B. - 2005. - V. 72. - P. 104508.
7. Moore K.T., van der Laan G. // Rev. Mod. Phys. – 2009. - V. 81. - P. 235.
8. Повзнер А.А., Волков А.Г., Филанович А.Н. // Письма в ЖТФ. - 2010. - Т. 36, Вып. 23. - С. 47-54.
9. Лукоянов А.В., Шорилов А.О., Анисимов В.И., Дремов В.В. // Письма в ЖЭТФ. – 2012. – Т. 96. – С. 499-503.